

УДК: 544.2; 541.124; 539.141

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ КРИСТАЛЛА ТРИАМИНОТРИНITРОБЕНЗОЛА****Г.Т. Смагулова, Ж.Р. Уалиев, З.А. Мансуров**

Институт проблем горения, 050012, Казахстан, г. Алматы, ул. Богенбай батыра, 172

e-mail: [smagulova.gauhar@inbox.ru](mailto:smagulova.gauhar@inbox.ru)**Аннотация**

Математическое моделирование как аппарат исследования сложных комплексов взаимосвязанных физико-химических процессов, протекающих при зажигании и горении конденсированных веществ, активно развивается в настоящее время. В работе проведено численное моделирование процесса воспламенения одиночного кристалла триаминотринитробензола (ТАТБ). В качестве основной модели расчета параметров зажигания одиночного кристалла, была взята модель зажигания кристалла взрывчатого вещества с учетом анизотропии его свойств и связности тепловых, химических и механических процессов. Из полученных данных следует, что в силу значительной роли выгорания и качественного отличия характеристики зоны реакции, данная модель отличается от тепловой теории воспламенения. Согласно расчетам, задержка времени воспламенения имеет экспоненциальную зависимость от начальной температуры. Приведены результаты расчета глубины превращения и распределения температуры в реакционной зоне от времени, при вырожденном режиме зажигания. Показано, что область существования нормальных режимов зажигания сужается при увеличении количества внутренних деформаций (трещины, полости, поры, дислокации) и в значительной степени зависит от глубины выгорания вещества. Показано значительное влияние концентрационного и структурного расширения на характеристики зажигания, за счет изменения энергии активации химической реакции под действием механических процессов. Рассмотрены химические реакции, протекающие в начальный момент зажигания кристалла, так при воспламенении, первичной стадией, является отрыв групп  $\text{NO}_2$  от молекулы ТАТБ, данная реакция является эндотермической. Затем происходит отрыв  $\text{NH}_2$ -группы от радикала. После отрыва  $\text{NO}_2$  и  $\text{NH}_2$ -групп происходит фрагментация бензольного радикала с образованием осколочных радикалов.

**Ключевые слова:** зажигание, горение, моделирование, температура, детонация

**Введение**

Компьютерное моделирование – один из самых мощных инструментов познания, анализа и проектирования, которым располагают специалисты, ответственные за разработку и функционирование сложных химических технологий и производств [1,2,3]. Однако, несмотря на то, что экспериментальные исследования играют ключевую роль в изучении импульсных устройств и технологий, использующих в своей основе взрывчатые вещества, без глубокого теоретического анализа, как правило, не удастся достичь требуемого результата. Как правило, при разработке теоретических моделей одними из приоритетных задач являются их приближение к реальным процессам и условиям экспериментов, обоснование адекватности и учет основных факторов, влияющих на условия протекания процесса [4,5].

Разработка и развитие подходов к математическому моделированию быстротекающих процессов позволяет сократить сроки проектирования и отладки технических устройств различного назначения. Для рассмотрения процессов, происходящих при воспламенении, горении, инициировании детонации необходимо знание комплекса физических, механических, химических и других свойств ВВ. Процессы горения и детонации являются многостадийными, имеют сложную структуру и, кроме того, трудности описания данных процессов увеличиваются в связи с необходимостью учета динамических эффектов. Для подавляющего большинства ВВ реакция возбуждения взрыва при механических воздействиях начинается как воспламенение в отдельных областях (очагах) разогрева ВВ, возникающих при диссипации механической энергии, которое может закончиться сгоранием или взрывом всей массы ВВ. Основными диссипативными процессами, вызывающими

образование очагов разогрева в твердых и жидких ВВ, являются процессы трения (внешнего и внутреннего) и адиабатного сжатия газовых полостей [6].

С точки зрения практических приложений весьма важно уметь правильно рассчитывать параметры процесса зажигания – энергию и время действия внешнего источника. В полной постановке задача о зажигании конденсированной системы включает стадии разогрева вещества, его реагирования в поверхностном слое с образованием продуктов горения, самоускорения химических реакций и выхода скорости горения на стационарный режим. При этом детального рассмотрения требуют процессы массо- и теплопереноса [7].

Теория зажигания конденсированных систем имеет практическое значение при определении чувствительности ВВ к трению и тепловому импульсу [8,9]. Как известно стационарному процессу горения всегда предшествует переходный и нестационарный режим зажигания. Механизмы зажигания конденсированных веществ весьма разнообразны – тепловой, цепной, фотохимический.

Интенсификация исследований в области теоретической и экспериментальной химии взрывчатых веществ (ВВ) обуславливается широким применением данного класса веществ в различных областях. Взрывчатые вещества являются источниками, концентрирующие огромный запас энергии. Роль взрывчатых веществ и выбор соответствующих их видов приобретает исключительное значение в связи с возможностью совершать с их помощью большую механическую работу [10-16]. Количество новых синтезированных и исследованных взрывчатых веществ неуклонно растет. Применение новых взрывчатых веществ (динитроазофуроксан, ТАТБ, FOX -7 и др.) [17] показало их более высокую эффективность по сравнению с классическими взрывчатыми веществами (тротил, гексоген, октоген). В настоящее время исследования в области химии взрывчатых веществ ориентированы на синтез соединений, превосходящих по скорости детонации известные взрывчатые вещества.

Как было сказано выше, ТАТБ является мощным взрывчатым веществом, являющееся перспективным ввиду своей низкой чувствительности. В настоящее время в США ТАТБ принят как стандартное малочувствительное взрывчатое вещество (класс IHE), а его смеси с Kel-F (сополимер хлортрифторэтилена с винилиденфторидом) – в качестве стандартного

малочувствительного состава. Повышенный интерес исследователей к ТАТБ обуславливается низкой чувствительностью к механическим и тепловым воздействиям. ТАТБ и составы на его основе отличаются очень низкой чувствительностью к первичным средствам инициирования, к ударно-волновому воздействию, к электрической искре и тепловому воздействию. ТАТБ находит применение в боевых зарядах высокоскоростных управляемых снарядов, включая ядерные боеголовки. ТАТБ по максимальной теплоте взрыва (энергии молекул) уступает тротилу, вследствие большого количества водорода в данном соединении. Относительно высокая мощность для ТАТБ (~80–90% от мощности октогена) обеспечивается высокой плотностью. Снижение мощности компенсируется повышенным уровнем безопасности, так как заряд остается инертным при высокоскоростном ударе или при действии луча огня.

### Экспериментальная часть

Характер влияния механических процессов на параметры зажигания и горения конденсированных систем имеет значение, ввиду частых случаев перехода конвективного горения деформированных и пористых систем во взрыв при изучении горения гетерогенных конденсированных систем под действием статических нагрузок и при исследовании влияния технологических микроповреждений на характеристики горения при выяснении механизма и роли диспергирования в процессе горения. Как известно, тепловыделение, внешний нагрев, а также образование и накопление продуктов реакции приводят к появлению внутренних напряжений и деформаций, способствующих увеличению и продвижению дислокаций, играющих важную роль в кинетике твердофазных реакций, в частности реакций разложения (горения) ВВ и гетерогенных конденсированных систем [18].

В качестве основной модели, расчета параметров зажигания одиночного кристалла ТАТБ была взята модель зажигания кристалла ВВ с учетом анизотропии его свойств и связности тепловых, химических и механических процессов, подробно описанной в работах [19-21].

Свободная энергия  $f$  локального объема анизотропной среды с точностью до слагаемых второго порядка малости по деформациям может быть представлена в виде:

$$f(\varepsilon_{ij}, T, N_q, v_p) = C_{ijkl} \left[ \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} - \frac{\omega_{kl}}{3} \varepsilon_{ij} \right] + f_0(T, N_q, v_p) \quad (1)$$

где  $\varepsilon_{ij}$  – компоненты тензора деформаций, определенные в смысле Коши,

$T$  – температура;

$N_q$  – концентрации компонентов реакционной смеси;

$v_p$  – удельный объем повреждений (трещин, пор, полостей) м<sup>3</sup>/г;

$\omega_{kl}$  – компоненты тензора.

Для расчетов условно был взят гексагональный кристалл.

Результат численного моделирования в значительной степени зависит от выбора безразмерных переменных. Используя подходящие для данной численной задачи переменные, можно сократить число параметров, от которых зависит решение задачи.

В переменных, характерных для задач зажигания:

$$y, \eta, \theta = \frac{T - T_0}{RT_0^2} E_a, \tau = \frac{t}{t_*} \quad (2)$$

$$\xi = \frac{z}{\sqrt{\kappa t_*}}, s_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_*}, e_{ij} = \frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_*} \quad (3)$$

где

$$\kappa = \frac{\lambda_2}{c_\varepsilon \rho}, t_* = \frac{c_\varepsilon \rho RT_0^2}{E_a |Q_T| k_T} \exp \frac{E_a}{RT_0} \quad (4)$$

$$\sigma_* = \frac{E_2}{1 - v_2} \frac{\alpha_2^{(T)} RT_0^2}{E_a}, \varepsilon_* = \alpha_2^{(T)} \frac{RT_0^2}{E_a} \quad (5)$$

Система уравнений для модели имеет следующий вид:

$$[1 + \omega_1(1 + \beta\theta)] \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1 - \omega_1 g_1(1 + \beta\theta)}{\gamma_1} \frac{\partial y}{\partial \tau},$$

$$\frac{\partial y}{\partial \tau} = \gamma_1 \varphi_1(y, \eta) \exp \frac{\theta}{1 + \beta\theta}.$$

В модели, кроме описанных выше, присутствуют еще несколько безразмерных параметров:

$$\theta_0 = \frac{T_* - T_0}{RT_*^2} E_a, \gamma_1 = \frac{c_\varepsilon \rho RT_*^2}{E_a |Q_T|}, \beta = \frac{RT_*}{E_a} \quad (6)$$

$$Q_\varepsilon = \frac{q_\varepsilon E_a}{RT_*^2} \sqrt{\frac{t_*}{c_\varepsilon \rho \lambda_2}}, \omega_1 = \frac{\omega}{\beta}, h_2 = \frac{1 - v_2 E_2}{1 - v_2 E_1} \quad (7)$$

## Результаты и обсуждение

С помощью программы «МАХИМА» был рассчитан параметр задержки времени воспламенения (период индукции) для кристалла ТАТБ (таб. 1) по уравнению (4) при различных температурах. Температура варьировалась от 643 до 743 К.

Таблица 1 – Задержка времени воспламенения

|       |       |       |      |      |      |      |      |      |      |      |      |
|-------|-------|-------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| T, К  | 643   | 653   | 663  | 673  | 683  | 693  | 703  | 713  | 723  | 733  | 743  |
| T, нс | 18,05 | 10,05 | 5,70 | 3,29 | 1,93 | 1,15 | 0,70 | 0,43 | 0,27 | 0,17 | 0,10 |

В качестве начальной температуры была взята температура вспышки ТАТБ, равная 643 К [24]. Как видно из графика (рисунок 1), задержка времени воспламенения имеет экспоненциальную зависимость от начальной температуры. И с увеличением температуры значение времени стремится к «0», то есть при достижении определенной температуры произойдет самовоспламенение (тепловой взрыв). Период индукции является важной характеристикой зажигания конденсированных систем. Она помогает более полно понять процессы предшествующие устойчивому зажиганию. Так, в [25] показано, что установление стационарного режима горения при тепловом импульсе напрямую зависит от энергии актива-

ции, т. е. при одинаково равных условиях конденсированное вещество с меньшей энергией активации воспламенится раньше. Суммарное время зажигания можно разделить на время прогрева и время химической индукции. Таким образом, период индукции и, следовательно, суммарное время зажигания – однозначные функции градиента температуры на поверхности конденсированного вещества.

Для более точного вычисления характеристик зажигания, в частности времен задержки воспламенения, а также установления некоторых специфических особенностей механизмов, например выделения возможных режимов зажигания, необходимы двумерные или пространственные модели.

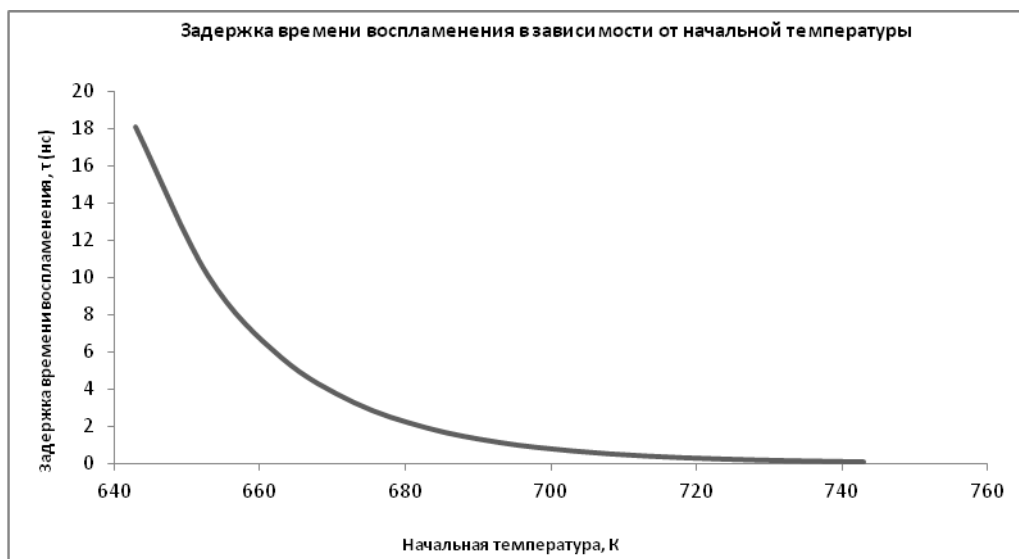
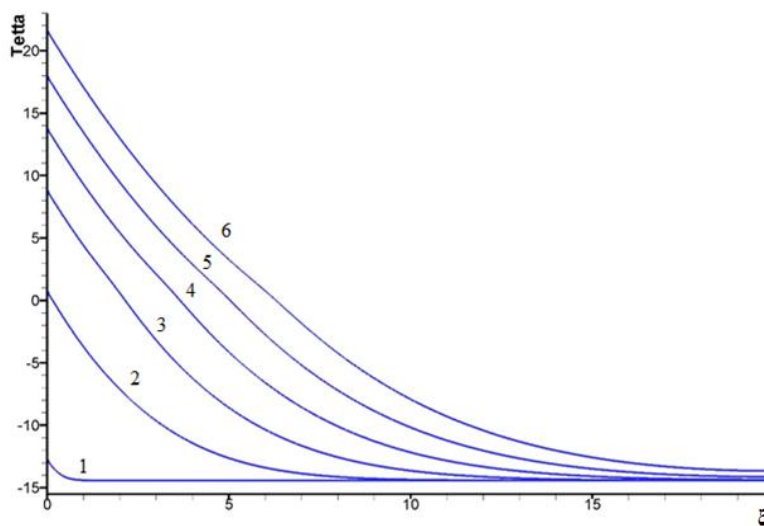


Рис. 1 – Зависимость задержки времени воспламенения от начальной температуры

Расчеты по вычислению глубины превращения и распределения температуры в реакционной зоне от времени при вырожденном режиме зажигания представлены на рисунках 2, 3.

На рисунке 2 наглядно проиллюстрировано влияние времени воздействия внешнего

источника (воспламенителя) на распределение температуры ( $\theta$  безразмерная температура) поверхности, так как  $\xi$  имеет обратную зависимость от характеристического времени по уравнению (3).



при  $\tau$  равном: 1) 0,01; 2) 4,0; 3) 12,0; 4) 26,8; 5) 40,0; 6) 52,0

Рис. 2 – Распределение температуры в различные моменты времени (вырожденный режим зажигания)

Известно, что в твердом теле различные физические и химические процессы взаимосвязаны. Так, химическая реакция ускоряется с повышением температуры, а выделение (или поглощение) тепла в реакции изменяет температуру образца. Очевидна связь между тепло-

выми и деформационными явлениями: нагрев тела сопровождается его расширением (деформацией), а релаксация поля напряжений возможна в форме выделения тепла [24].

Рассмотрим зависимость глубины превращения от времени воздействия внешнего

источника. Как видно из рисунка 3, глубина превращения (полнота реакции) также в значительной степени зависит от времени воздействия внешнего воспламенителя. Это объясняется тем, что необходимо большее время на прогрев образца и перехода его на стационарный режим.

Зависимость степени выгорания от времени от типа кинетических функций, отражает механизм реакции на микроуровне, а также иллюстрирует изменение структуры образца, так как горение кристаллического ТАТБ сопровождается значительными объемными изменениями и накоплением повреждений или разрушением образца.

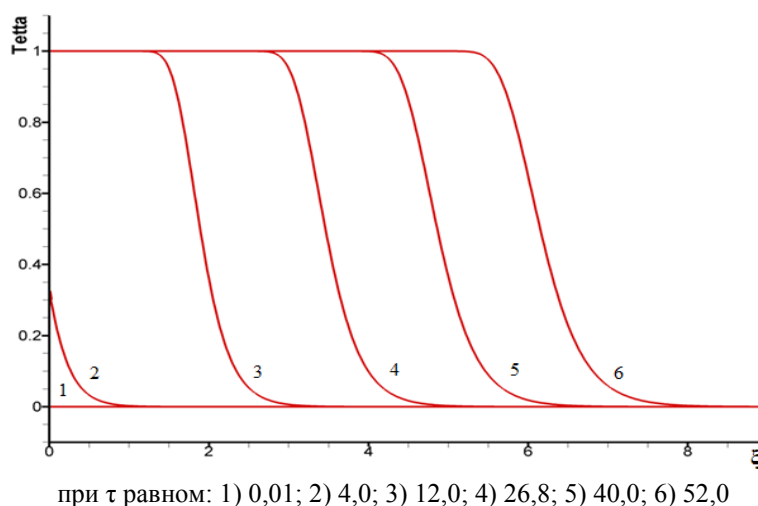


Рис. 3 – Распределение глубины превращения в различные моменты времени (вырожденный режим зажигания)

Из полученных данных видно, что в силу значительной роли выгорания и качественного отличия характеристики зоны реакции, данная модель отличается от тепловой теории воспламенения.

### Схема начальной стадии разложения триаминаотринитробензола

Моделирование кинетики процессов в реакционных системах с участием электронно – возбужденных атомов и молекул – актуальное направление изучения закономерности горения и детонации. Однако на это требуется большие затраты компьютерного времени, и в настоящее время данный расчет представляет большую сложность даже для небольших реакционных систем, включающих только несколько атомов.

При исследовании кинетики и механизмов разложения ВВ, а также при изучении особенностей процессов горения и детонации ВВ необходимо построение математических моделей многостадийных химических реакций. Разложение ВВ описывается сложной кинетической схемой, включающей от нескольких сотен до десятков тысяч стадий. Для точного количественного описания эволюции сложной

реакционной системы необходимо применение численных методов, знание механизма реакции и значение констант скорости каждой элементарной стадии. Оценка проведения сложных систем на качественном уровне упрощается, если можно объединить группы сходных реакций и использовать аналитические решения простых систем дифференциальных уравнений. В последние годы при математическом моделировании горения ВВ используют многофазные модели с детальными кинетическими механизмами.

Исследование разложения ВВ тесно связано с одной из фундаментальных проблем химической кинетики – разработкой физической модели реакции в твердой фазе, с учетом фазообразования и фазовых переходов. Кинетика разложения ВВ в твердой фазе зависит от свободного объема кристалла, типа элементов свободного объема (вакансии, кластеры, микроразрывы, трещины и др.) и их эволюции в процессе разложения.

При высокотемпературном разложении веществ, протекает огромное количество реакций, конкурирующих между собой. Те или иные условия протекания процесса будут определять преобладающий механизм распада молекул. При этом особый интерес представ-

ляет первичный акт реакции. В общем случае, наиболее вероятной первичной стадией распада является гомолитический разрыв химической связи  $C-NO_2$ . Для ароматических нитропроизводных (в том числе ТАТБ) также характерной стадией термического разложения является нитро-нитритная перегруппировка и образование бициклического интермедиата (рисунок 4) [25]. При понижении температуры вклад нитро-нитритной перегруппировки возрастает.

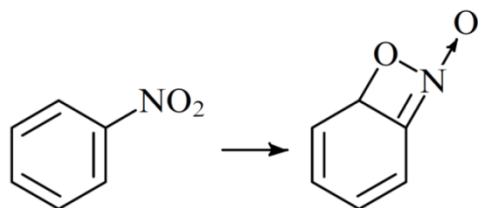


Рис. 4 – Схема нитро-нитритной перегруппировки и образования бициклического интермедиата [25]

Конечный итог реакций взрывного превращения выражают обычно уравнением, связывающим химическую формулу исходного ВВ или состав его (в случае взрывчатой смеси) с составом конечных продуктов взрыва. Знание уравнения химического превращения при взрыве существенно в двух отношениях. С одной стороны, по этому уравнению можно рассчитать теплоту и объем газообразных продуктов взрыва, а следовательно, и температуру, давление и другие его параметры.

Согласно [26], методов определения химического состава продуктов непосредственно в зоне химических реакций детонационной волны не существует. В настоящее время существуют методы определения химического состава продуктов детонации, но при умеренных условиях (температура, давление), т.е. на определенном расстоянии от зоны химической реакции. Однако данная информация не дает полного представления о радикально – цепном механизме взрывного разложения ВВ. И с этой позиции, важную роль играет понимание начальных стадий разложения молекул ВВ, приводящее к дальнейшему распространению зоны химической реакции.

Рассмотрим химические реакции, протекающие в начальный момент зажигания кристалла с учетом анализа работ, проведенных различными авторами. Как известно горение является сложным физико – химическим процессом [11,27-29]. Механизм горения подчиняется радикально – цепному механизму, соглас-

но которому возбуждение реакции в непрореагировавших слоях конденсированного вещества осуществляется за счет возбуждения цепной реакции активными частицами (радикалы, ионы).

Связь  $C-NO_2$  в молекуле ТАТБ является самой слабой (рисунок 5), и ее разрыв является лимитирующей стадией разложения. Авторами [30] были проведены квантово-химические расчеты отрыва радикала  $NO_2$  от молекулы ТАТБ, энергия которого составила  $\sim 60-70$  ккал/моль, а для радикала  $NH_2 \sim 120$  ккал/моль.

В молекулах ВВ, как правило, имеется несколько активных реакционных центров, которые нередко являются разнотипными. В молекуле ТАТБ этими центрами выступают связи с  $NO_2$  и  $NH_2$ -группами.

Таким образом, проделанные вычисления и анализ литературных данных позволили сделать следующие предположения о начальной стадии разложения ТАТБ (рисунок 6).

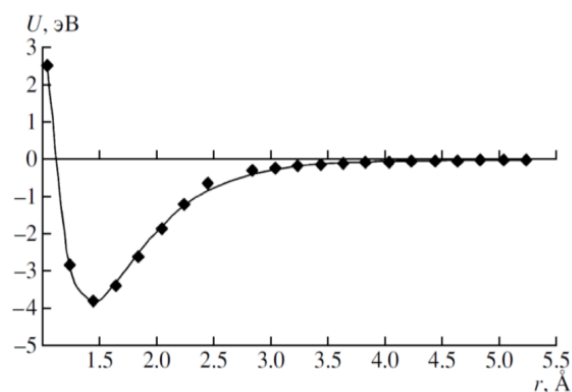


Рис. 5 – Зависимость энергии связи  $C-NO_2$  от межатомного расстояния в молекуле ТАТБ (точки расчет, линия – аппроксимация потенциалом Морзе)

Дальнейшее взаимодействие данных радикалов приводит к образованию  $\cdot HO$ ,  $\cdot CNO$ , отвечающие за разветвление реакции и переход воспламенения в устойчивое горение [31].

При разложении молекулы ТАТБ происходит

$NH_2$ , что также подтверждается квантово – химическими расчетами. Дальнейшее взаимодействие данных радикалов между собой и с молекулами непрореагировавшего вещества образует конечные продукты горения  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$ ,  $H_2$ ,  $CH_4NH_3$ ,  $C_2N_2$ ,  $HCN$ ,  $NO$ ,  $N_2O$ ,  $C$ .

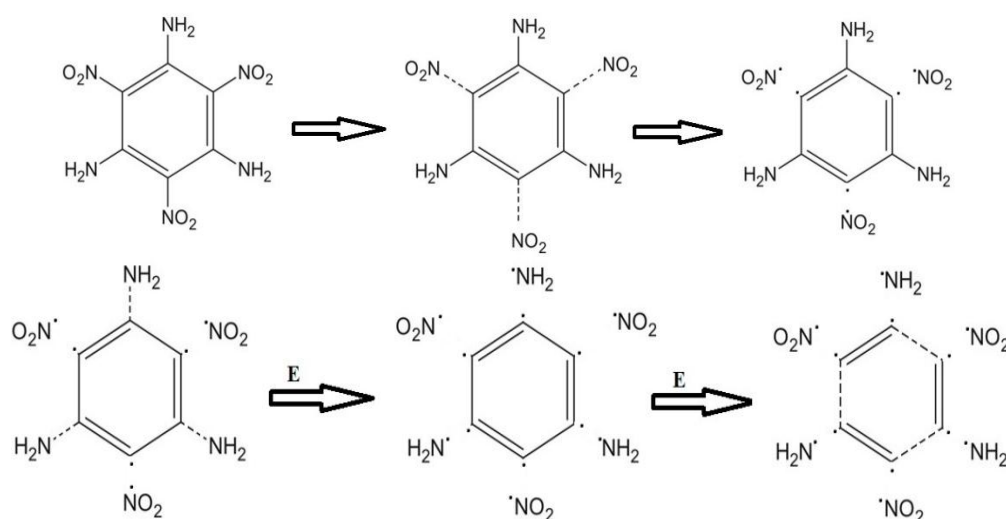


Рис. 6 – Схема начальной стадии разложения молекулы ТАТБ при воспламенении

## Выводы

На основе численных расчетов зажигания одиночного кристалла ТАТБ по модели, учитывающей взаимосвязанный характер переноса тепла, деформирования и разрушения при инициировании химической реакции в твердом веществе можно сделать следующие выводы:

- задержка времени воспламенения имеет экспоненциальную зависимость от начальной температуры. И с увеличением температуры значение времени стремится к «0», то есть при достижении определенной температуры произойдет самовоспламенение (тепловой взрыв);

- при учете связности тепловых и механических процессов время зажигания резко возрастает (в силу зависимости эффективной теплоемкости от температуры);

- подключение химических реакций резко увеличивает деформации в поверхностном слое из-за ускорения роста температуры и увеличения глубины превращения;

- в рассматриваемых случаях не всегда можно говорить о стационарном режиме зажигания. Происходит изменение формы температурной кривой от линии с ярко выраженным перегибом в момент подключения химических реакций до кривой, характерной для вынужденного реагирования – режим зажигания. То есть, при отключении внешнего источника в первом случае возможно самостоятельное распространение фронта реакции, во втором реакция прекращается;

- область существования нормальных режимов зажигания сужается при увеличении

количества внутренних деформаций (трещины, полости, поры, дислокации) и в значительной степени зависит от глубины выгорания вещества;

- при воспламенении, первичной стадией, является отрыв групп  $\text{NO}_2$  от молекулы ТАТБ, данная реакция является эндотермической. Затем происходит отрыв  $\text{NH}_2$ -группы от радикала. После отрыва  $\text{NO}_2$  и  $\text{NH}_2$ -групп происходит фрагментация бензольного радикала с образованием осколочных радикалов  $\text{C}=\text{C}$ ;

- на характеристики зажигания значительное влияние имеют концентрационное и структурное расширения, за счет изменения энергии активации химической реакции под действием механических процессов.

Однако полученные результаты требуют дальнейшего совершенствования системы математического моделирования.

Требуется дальнейшее усовершенствование математической модели и расчетов с целью учета кинетики разложения ВВ. Тем не менее, результаты исследования могут быть полезны при выяснении механизма быстрого разложения в твердой фазе (твердофазная детонация), для которого характерно аналогичное разделение на химическую и механическую стадии. Понимание микроскопической теории воспламенения на примере ТАТБ является важной составляющей развития научной базы процессов детонации взрывчатых веществ с целью полного использования их энергетического потенциала и безопасного применения.

Авторы выражают благодарность за помощь при написании статьи доктору физико-

математических наук, профессору Князевой Анне Георгиевне.

## Литература

1. Erjiang Hu, Zuohua Huang, Jiajia He, Chun Jin, Jianjun Zheng. Experimental and numerical study on laminar burning characteristics of premixed methane–hydrogen–air flames // *International journal of hydrogen energy*. – 2009. – № 34. – P. 4876 – 4888.
2. Gordon R. L., Masri A. R., Pope S. B. and Goldin G. M. A numerical study of auto-ignition in turbulent lifted flames issuing into a vitiated co-flow // *Combustion Theory and Modelling*. – June 2007. Vol. 11. – No. 3. P. 351–376.
3. Современные проблемы исследования быстропротекающих процессов и явлений катастрофического характера / Под. ред. О.М. Белоцерковского и др. – М.: Наука. – 2007. – 223 с.
4. Кузнецов Г.В., Стрижак П.А. Одномерные, двумерные и пространственные модели газофазного зажигания жидких конденсированных веществ локальными источниками энергии // *Труды Междунар. конф. Химическая и радиационная физика*. – 25 – 29 августа 2009 г.
5. Yang, V. Modeling of supercritical vaporization, mixing, and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems // *Proceedings of the 28th International Symposium on Combustion*. Pittsburgh. – 2000.
6. Амосов А.П. Теория воспламенения взрывчатых веществ при механических воздействиях // *Вест. Сам. гос. тех. ун-та. Серия Физ.- мат. науки*. – 1996. – вып. 4. – С. 208 – 235.
7. Tavernetti W. E., Hafez M. M. A Numerical Study of Chaotic Dynamics in Thermal Ignition and Chemically Reactive Swirling Flow // *Seventh International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD7)*. – Big Island Hawaii. – July 9-13, 2012.
8. Вилунов В.Н. Теория зажигания конденсированных веществ. Новосибирск: Изд-во «Наука». – 1984. – 190 с.
9. Javad A. Esfahani, Antonio C.M. Sousa Ignition of epoxy by a high radiation source. A numerical study // *Int. J. Therm. Sci.* Elsevier, Paris. – 1999. № 38. – P. 315-323.
10. Митрофанов В. В. Детонация гомогенных и гетерогенных систем.- Новосибирск: Изд-во Ин-та гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 2003. – 200 с.
11. Храмов Г.Н. Горение и взрыв. Монография. – СПб.: СПбГПУ-2007.-278 с.
12. Магойченков М. А., Галаджий Ф.М., Росинский Н.Л. Мастер – Взрывник. – М.: Недра, 1975.-288 с.
13. Кушнарев Д.М. Использование энергии взрыва в строительстве. – М.: Стойиздат, 1973.- 289 с.
14. Орлова Е.Ю., Орлова Н.А., Жилин В.Ф. и др. Октоген – термостойкое взрывчатое вещество.- М.: Недра, 1975.-128 с.
15. Ловля С.А., Каплан Б.Л., Майоров В.В. и др. Взрывное дело. – М.: Недра, 1976.- 272 с.
16. Яблоков В.А. Теория горения и взрывов.- Н.Новгород, 2007. – 61 с.
17. Ernst - Christian Koch, Pierre - François Péron. Synoptic review on insensitive explosive molecules. // *ICT 41th, Karlsruhe*.- 29 June – 02 July 2010. V5.
18. Knyazeva A.G., Evstigneev N.K. Interrelations between heat and mechanical processes during solid phase chemical conversion under loading // *Elsevier. Procedia Computer Science*. – 2010. – №1. – P. 2613–2622.
19. Князева А.Г. О зажигании кристаллов взрывчатых веществ // *Физика горения и взрыва*. – 2001. – Т. 37 (№3). – С. 94 – 105.
20. Knyazeva A.G., Zarko V.E. The effect of chemically induced stresses and deformations on the ignition of solid propellants // *Challenges in propellants and combustion. 100 years after Nobel*. Begell house, inc. New York. Wallingford (U.K.). – 1997. – P. 762 – 773.
21. Knyazeva A.G., Dyukarev E.A. On the modes of solid phase decomposition of single crystals of priming explosives // *Physical Meso-mechanics*. – 2000. – 3 (№3). – P. 93 – 102.
22. Жилин В.Ф., Збарский В.Л., Юдин Н.В. Малочувствительные взрывчатые вещества. Москва. – 2008. – 160 с.
23. Дик И.Г., Селиховкин А.М. Модель зажигания и перехода к горению конденсированного газифицирующегося вещества // *Математическое моделирование*. – 1991. – Т.3 (№ 4). – С. 3 – 11.
24. Князева А.Г., Кузнецов В.Т. Разрушение поверхностного слоя нитроглицеринового пороха в процессе зажигания при различных начальных температурах // *Физика горения и взрыва*. – 1995. – Т. 31 (№ 4). – С. 10-19.
25. Смирнов Л.П. Математическое моделирование процессов разложения взрывчатых веществ // *Успехи химии*. – 2010. – Т. 79 (№5). – С. 466-483.

26. Бахрах С.М. Володина Н.А., Гушанов А.Р. Численное моделирование инициирования взрывчатых превращений в твердом взрывчатом веществе при низкоскоростных воздействиях // Химическая физика. – 2008. – Т. 27 (№8). – С. 70 – 76.

27. Гусаченко Л.К., Зарко В.Е., Зырянов В.Я., Бобрышев В.П. Моделирование процессов горения твердых топлив. Новосибирск: Наука СО. – 1985. – 182 с.

28. Сполдинг Д.Б. Основы теории горения. М.: Гос. Энерг.-ое Изд-во. – 1959. – 320 с.

29. Зельдович Я. Б. Компанеев А. С. Теория детонации. – М.: Гос. изд-во техн.-теор. литер. – 1955. – 268 с.

30. Гребенкин К.Ф., Горшков М.М., Жеребцов А.Л., Попова В.В., Тараник М.В. Оценки скорости распространения волны горения из «горячих точек» при ударно-волновом инициировании ТАТБ// Труды VII Междунар. конф. «Забабахинские научные чтения». -8-12 сентября 2003 г.

31. Зеленкин В.Г., Боровик С.И., Бабкин М.Ю. Теория горения и взрыва: конспект лекций. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. – 2011. – 166 С.

## MODELING IGNITION OF CRYSTAL TRIAMINOTRINITROBENZENE

G.T. Smagulova, Zh.R. Ualiyev, Z.A. Mansurov

Institute of Combustion Problems, Bogenbai Batyr St., 172, Almaty, Republic of Kazakhstan

e-mail: [smagulova.gauhar@inbox.ru](mailto:smagulova.gauhar@inbox.ru)

### Abstract

Mathematical modeling as a tool of investigation of complex sets of interrelated physical and chemical processes that occur during ignition and combustion of condensed substances is being rapidly developing at present. In this paper presented a numerical simulation of the single crystal ignition triaminotrinitrobenzene (TATB). As a basic model for calculating parameters of ignition single crystal is modeled ignition of the explosive with a crystal anisotropy of its properties and cohesion thermal, chemical and mechanical processes. The data obtained show that due to the significant role of burnout and quality characteristics of the reaction zone differences, this model differs from the thermal theory of ignition. According to calculations, the ignition delay time has an exponential dependence on the initial temperature. In the paper presented the results of the calculation of the degree of conversion and the temperature distribution in the reaction zone from time to time, with the degenerate mode switch. It is shown that the region of existence of normal modes ignition narrowed by increasing the amount of internal deformation (cracks, cavities, pores, dislocations) and largely depends on the burn up substance. Significant influence of the concentration and structural expansion on ignition characteristics, by changing the activation energy of a chemical reaction induced by mechanical processes. The chemical reactions occurring at the initial ignition of the crystal, as in the ignition, the initial stage, is the abstraction of NO<sub>2</sub> groups from the molecule TATB, this reaction is endothermic. Then is detached NH<sub>2</sub>-groups of the radical. After detachment NO<sub>2</sub> and NH<sub>2</sub>-groups of the benzene radical fragmentation occurs with the formation of radical fragmentation.

## ЖАНУ CRYSTAL ТРИАМИНОТРИНИТРОБЕНЗОЛ МОДЕЛЬДЕУ

Г.Т. Смагулова, Ж.Р. Уалиев, З.А. Мансуров

Жану проблемалары институты, 050012, Қазақстан, Алматы қ., Бөгенбай батыр к-ші, 172

e-mail: [smagulova.gauhar@inbox.ru](mailto:smagulova.gauhar@inbox.ru)

### Аннотация

Конденсациялаған заттарда жану және жануда ағатын өзара байланысты физикалық - химия процесстердің күрделі кешендердің зерттеулер аппаратты сияқты математикалық пішіндеу осы уақытта белсенді дамып жатыр. Жұмыста триаминотринитробензола (ТАТБ) дара кристалының тұтану процесінің сандық модельдеу берілген. Алынған мәліметтерге сәйкес жанып кету және реакция аумағының сапалық айырмашылықтары ролінің маңыздылығына байланысты, бұл модель тұтанудың жылулық теориясынан ерекшеленеді. Есептеулер бойынша, тұтанулар уақыттың тоқтауы бастапқы температурадан экспоненталық тәуелді. Қалыпты тұтану режимдердің аумағы ішкі деформация көбейген жағдайда (жарық, қуыс, тесіктер) кішірейетіні көрсетілген. Концентрациялық және құрылыстық кеңейулердің тұтану процесі қасиеттеріне маңызды әсері келтірілген. Кристаллдың тұтану процесіндегі бастапқы химиялық реакциялары, тұтану, эндотермиялық реакция болып табылатын, ТАТБ молекулаларынан NO<sub>2</sub> топтарының үзілуі бірінші кезең, қарастырылған. Артынша радикалдан NH<sub>2</sub> тобының үзілуі жүреді. Бұл топтардың үзілуінен кейін сынық радикалдардың пайда болуымен бензолды радикалдың фрагментациясы жүреді.